磁場中のPolaronの運動

AUTHOR(S):
波田野, 彰; 中山, 正敏

CITATION:
波田野, 彰 ...[et al]. 磁場中のPolaronの運動. 物性研究 1964, 3(3): 121-129

ISSUE DATE:
1964-12-20

URL:
http://hdl.handle.net/2433/85637

磁場中のPolaronの運動

波田野　　彰（東大教養物理）
中　山　正　敏（東大教養基礎科学）

〔11月4日受理〕

§1 Introduction

有極性結晶中では電子は格子の変位分極との相互作用が強いために、bandの状態に更に光学phononの雲を伴つたquasi-particle—— polaronとして振舞うということは、Fröhlich以来多くの人々によつて理論的に検討されてきた[1]。近年、銀，アルカリハライド結晶製作の技術の進歩に伴つて、これらの結晶のintrinsicな電子的性質の実験的研究もようやく盛んになつてきている[2]。これらは既存のpolaron理論の検証として役立つであろうが、一方では具体的な物質の電子的構造の解明に役立つ理論の展開を要求している。この論文では、一様な静磁場がpolaronの運動に及ぼす影響について考察することにしよう。

立方反転対称の結晶で、電子のbandが$k=0$に極小をもち縮退していない場合を考えることにする。磁場がない時のpolaronのenergyの計算は多くの人によつてなされているが、この論文では、我々はくり込みの方法によつた。この方法は§2～3で詳述するが、quasi-particleとしてのpolaronの運動を表すHamiltonianを運動量pの函数として$\epsilon(p)$の形で与える。さて一様な静磁場の影響はvector potential Aが有界でないので、単純な摂動論では扱えない事がよく知られている。bandの場合には、Hamiltonianは$\pi=p+\frac{e}{c}A$として$\epsilon(\pi)$と書ける部分（有効質量近似）と、それに対する補正項として表される。補正項もまた、πの函数であるが、その他にあらたに磁場を含んでいる。この磁場への依存性は、πの成分が非可換であることに由来している。我々は§4でこの考えをpolaronの場合に適用し、Hamiltonianを$\epsilon(\pi;H)$の形で求めた。$\epsilon(\pi;H)$のπの函数としての形がHに依存してϵから変化するのは、磁場によつて電子の運動が変化するため光学phononの雲が変化するためである。このため基底状態のエネルギー、有効質量の磁場によ

る変化が起りうる。この効果は、$\alpha(\omega_c/\omega)^2$ の程度であつて、band の場合に期待される効果 $(\hbar\omega_c/\Delta E)^2$ に比べてかなり大きく、実験で検証される可能性があると期待される。

§2 Canonical 変換と Renormalization

静磁場中での電子ー格子系を連続体近似による Fröhlich の Hamiltonian で表そう。

$$\left.\begin{aligned} H &= H_0 + H_{ph} + H_I \\ H_0 &= \pi^2 \\ H_{ph} &= \sum_k a_k^+ a_k \\ H_I &= \sum_k \{ V_k a_k e^{ikr} + V_k^+ a_k^+ e^{-ikr} \} \end{aligned}\right\} \quad (1)$$

ここで

$$\pi = p + \frac{e}{c} A \quad (2)$$

$$V_k = -\frac{i}{k}\sqrt{\frac{4\pi\alpha}{V}}\left(\frac{\hbar}{2m\omega}\right)^{3/4} \quad (3)$$

$$\alpha = \frac{e^2}{2\hbar c}\sqrt{\frac{2mc^2}{\hbar\omega}}\left(\frac{1}{n^2}-\frac{1}{\epsilon}\right) \quad (4)$$

である。但しつぎのような単位を用いる。

energy : $\hbar\omega$

momentum : $\sqrt{2m\hbar\omega}$

磁　場 : $\frac{1}{2}\left(\frac{\omega_c}{\omega}\right) \equiv s$

ω は optical phonon の frequency, ω_c は cyclotron frequency $(\omega_c \equiv \frac{e}{mc}H)$, m は band electron のはだかの mass である。

ここで 1) の H_0 の部分をくり込んだ polaron quasi-particle を表わす Hamiltonian $\widetilde{H} = \epsilon(\pi)$ を使つて形式的に書きなおす。

$$H = H + H_{ph} + H_I + \varDelta H \tag{5}$$

$$\varDelta H = H_0 - \widetilde{H} \tag{6}$$

(5)の Hamiltonian に対して次のような canomical 変換を行う。

$$U = e^S \tag{7}$$

$$\mathscr{H} = U H U^{-1} \tag{8}$$

$$= \widetilde{H} + H_{ph} + [S, \widetilde{H} + H_{ph}] + H_I$$
$$+ \frac{1}{2}[S, [S, \widetilde{H} + H_{ph}]] + [S, H_I] + \varDelta H$$
$$+ (\text{Sに関する higher order}) \tag{9}$$

ここで、H_Iのうちで virtual process を表す部分を 1 st order で消すようにSをえらぼう。

$$[S, \widetilde{H} + H_{ph}] + H_I = 0 \tag{10}$$

それにはSの形として

$$S = \Sigma_k S_k = \Sigma_k (a_k f_k(\pi) e^{ikr} - a_k^+ f_k^+(\pi) e^{-ikr}) \tag{11}$$

とおく事にする。この $f_k(\pi)$ は電子に対する operator である点を注意しておく。(11)を(10)に代入する事により、$f_k(\pi)$ を決める方程式として

$$[f_k(\pi), \epsilon(\pi)] + f_k(\pi)\{\epsilon(\pi - k) - \epsilon(\pi) + 1\} = -V_k \tag{12}$$

を得る。

つぎにこの $\epsilon(\pi)$ を決定する方程式として

$$\frac{1}{2}[S, H_I]_d + \varDelta H = 0 \tag{13}$$

但し $[\cdots]_d$ はこの operator の phonon 座標を含まぬ部分をあらわす。以上の手続きによつて$\mathscr{H}$はSの二次までは

$$\mathscr{H} = \epsilon(\pi) + H_{ph} + H_I^{(real)} + \frac{1}{2}[S, H_I]^{(phonon)} \tag{14}$$

と求められる。

我々は上の $\epsilon(\pi)$ を一般的に求めることはむづかしいので近似的な計算を行うことにする。即ち $\epsilon(\pi)$を π に関して展開したとき π^2 の係数のみをself-consistent に決定し、高次の係数は、それを用いて表すことにする。即ち

$$S \to S_0$$

$$[S_0, \epsilon_0(\pi) + H_{ph}] + H_I = 0 \tag{10$'$}$$

$$\frac{1}{2}[S_0, H_I]_d^{(\pi^2 まで)} + \Delta H_0 = 0 \tag{13$'$}$$

$$\epsilon_0(\pi) = a + b\pi^2 \tag{15}$$

のごとく近似する。したがつて (12)は

$$[f_k(\pi), \epsilon_0(\pi)] + f_k(\pi)\{\epsilon_0(\pi-k) - \epsilon_0(\pi) + 1\} = -V_k \tag{12$'$}$$

となる。この近似の結果は (14)で

$$\epsilon(\pi) = \epsilon_0(\pi) + \frac{1}{2}[S_0, H_I]_d^{(\pi の4次以上)} \tag{16}$$

とおいた形で$\mathscr{H}$が求まる。もし $\epsilon_0(\pi) = \pi^2$ とおけばこれは完全に摂動展開となり S^2 まで求める計算では α^1 までの結果が得られる。ここでの方法は諸係数が $\alpha F(b(\alpha))$ の形で得られ、これは単なる摂動ではない。$\epsilon_0(\pi)$ として四次以上の項を含めることは、それらは $\alpha^2 F(b, \cdots)$ の形の寄与を与えることになる。またSの高次の項の寄与も同じorder であることを注意しておこう。

§3　磁場がない場合

§2での一般的な議論をまず磁場H = 0の場合に適用してみよう。この場合 $\pi = p$ である。$\epsilon(p)$ は一般につぎのように p^2 の巾で展開される。

$$\epsilon(p) = a + bp^2 + cp^4 + dp^6 + \cdots \tag{17}$$

また

$$\left[f_k(p)\ ,\ \epsilon_0(p) \right] = 0 \tag{18}$$

が成り立ち、従つて(12′)から $f_k(p)$ は

$$f_k(p) = -\frac{V_k}{\epsilon_0(p-k) - \epsilon_0(p) + 1} \tag{19}$$

$$= -\frac{V_k}{b k^2 - 2b(p\cdot k) + 1} \equiv -\frac{V_k}{g_k(p) - 2b(p\cdot k)} \tag{20}$$

一方(1)及び(11)から

$$\frac{1}{2}\left[S, H_1\right]_d = \frac{1}{2}\Sigma_k\left(f_k(p)\, V_k^+ + f_k^+(p)\, V_k \right) \tag{21}$$

$$= -\Sigma_k \frac{|V_k|^2}{g_k(p) - 2b(p\cdot k)} \tag{22}$$

ここで(22)の分母のpを展開し、kの和を積分に直きかえ V_k に(3)を代入する。その結果

$$\frac{1}{2}\left[S, H_1\right]_d = -\alpha\frac{2}{\pi}\int_0^\infty dk\, \Sigma_m (2b)^{2m}\frac{\langle(p\cdot k)^{2m}\rangle_\Omega}{g^{2m+1}} \tag{23}$$

$$= -\alpha\, \Sigma_m \frac{\{(2m-1)!!\}^2}{(2m+1)!}\, b^{m-\frac{1}{2}}\, p^{2m} \tag{24}$$

ここで $<\cdots>_\Omega$ はkのangle 平均である。以上から

$$a = -\frac{\alpha}{\sqrt{b}} \tag{25}$$

$$b = 1 - \alpha\frac{\sqrt{b}}{6} = \left[\sqrt{1 + \left(\frac{\alpha}{12}\right)^2} - \frac{\alpha}{12}\right]^2 \tag{26}$$

$$b^{-1} = \frac{m^*}{m} = 1 + \frac{\alpha}{6} + \frac{\alpha^2}{72} + \left(\frac{\alpha}{12}\right)^3 + \cdots$$

$$c = -\frac{3}{40}\alpha\, b\sqrt{b} \tag{27}$$

$$d = -\frac{5}{7\cdot 2^4}\alpha\, b^2\sqrt{b} \tag{28}$$

を得る。

このa，bの値はGreen 函数法でHartree-Fock 近似で切断を行ない、mass operator $\Sigma(k, \omega)$ の ω 依存性を無視した結果と一致する[2)]。またa，b c，dは α^1 まででは L.L.P. と一致する。

§4 磁場が存在する場合

$\epsilon(\pi)$の函数形はsをparameterとして $\epsilon(\pi_\perp^2, \pi_{/\!/}^2; s)$ の形をしていることが対称性から判る。但し⊥，// は磁場に関し、垂直、平行な成分を表すものとする。energy level はnを量子数として

$$E_n(n, p_{/\!/}) = \epsilon(2(n+\frac{1}{2})s, p_{/\!/}^2; s) \tag{29}$$

で与えられる。energy の固有値を s^3 まで求めるには ϵ の π，sでの展開で次式の項まで計算すればよい。

$$\epsilon(\pi; s) = a + b\pi^2 + c\pi^4 + d\pi^6$$
$$+ s^2(a' + b'\pi^2 + e\pi_{/\!/}^2) \tag{30}$$

これらの係数を $\alpha F(b(\alpha))$ の order まで求めるには、§2の手法に従つて $\epsilon_0(\pi) = a + b\pi^2$ としてbまでself-consistent に決めれば充分である。

今度は $\epsilon_0(\pi)$ と $f_k(\pi)$ とはcommute しないから $f_k(\pi)$ を決める式として(12′)を用い、$f_k(\pi)$ について

$$f_k(\pi) = f_k^0(\pi) + s f_k^1(\pi) + s^2 f_k^2(\pi) \tag{31}$$

として各々求めることにする。π の成分の間の交換関係

$$\pi \times \pi = \frac{s}{i} h \tag{32}$$

から、公式

$$[\pi, G(\pi)] = -\frac{s}{i}(h \times \nabla_\pi) G(\pi) \tag{32}$$

を使つて計算すれば磁場 s^0 , s^1 , s^2 について(12′)は各々

$$f_k^0(\pi)\{bk^2-2b(\pi\cdot k)+1\}=-V_k \tag{33}$$

$$2\frac{b}{i}\pi(h\times\nabla_\pi)f_k^0(\pi)+f_k^1(\pi)\{bk^2-2b(\pi\cdot k)+1\}=0 \tag{34}$$

$$2\frac{b}{i}\pi(h\times\nabla_\pi)f_k^1(\pi)-b(h\times\nabla_\pi)^2f_k^0(\pi)+f_k^2(\pi)\{bk^2-2b(\pi\cdot k)+1\}=0 \tag{35}$$

となる。但し上で用いたhはHの単位vector である。これから(21)でpを π で置き変えた式を用いて $\mathscr{H}$ が計算される。その結果 $f_k^1(\pi)$, $f_k^2(\pi)$ は(30)の a' , b' , e への寄与を与える。更に $f_k^0(\pi)$ の π による展開は§3の(23)でpを π で置き変えたものになるのだが $<(\pi\cdot k)^4>_\Omega$, $<(\pi\cdot k)^6>_\Omega$ の項を π^2 に関する対称式になおす際、 π の非可換性からやはり a', b', e への寄与を与える項があらわれる。即ち

$$<(\pi\cdot k)^4>_\Omega=\frac{k^4}{5}\{(\pi^2)^2+s^2\} \tag{36}$$

$$<(\pi\cdot k)^6>_\Omega=\frac{k^6}{7}\{(\pi^2)^3-5s^2\pi^2+2s^2\pi_{/\!/}^2\} \tag{37}$$

となる。

以上をまとめて(30)の諸係数を求めるとa, b, c, d …は§3の結果に一致し a' , b' , e は各々

$$\left.\begin{aligned} a' &= \alpha\frac{11}{480}b\sqrt{b} \\ b' &= \alpha\frac{23}{2^6\cdot3\cdot7}b^2\sqrt{b} \\ e &= \alpha\frac{1}{2^2\cdot3\cdot7}b^2\sqrt{b} \end{aligned}\right\} \tag{38}$$

となる。

§5 Discussion

磁場中の polaron の ground state ($n=0$, $p_{/\!/}=0$) の energy E_0 は、

$\epsilon(0,H)$ の磁場依存性とcyclotron 運動の0点energy を加え合せて、つぎのようにまとめられる。

$$E_0 = -\alpha^* + \frac{1}{2}\left(\frac{\omega_c^*}{\omega}\right) + \frac{\alpha^*}{240}\left(\frac{\omega_c^*}{\omega}\right)^2 + \frac{\alpha^*}{2^4\cdot 3\cdot 7}\left(\frac{\omega_c^*}{\omega}\right)^3 + \cdots \tag{39}$$

$$\alpha^* = \alpha/\sqrt{b}$$

$$\omega_c^* = b\,\omega = \frac{e}{m^* c}H$$

また $p_{/\!/}=0$ でのLandau level の間隔 $\Delta E = E(n+1,0) - E(n,0)$ は

$$\Delta E = \left(\frac{\omega_c^*}{\omega}\right)\left\{b + \frac{1}{4}b'\left(\frac{\omega_c}{\omega}\right)^2\right\} + \left(\frac{\omega_c}{\omega}\right)^2\left\{2(n+1)c + \left(3n^2+6n+\frac{13}{4}\right)d\left(\frac{\omega_c}{\omega}\right)\right\} \tag{40}$$

である。最近Larsen はLee-Low-Pines の方法を磁場がある場合に拡張し、energy を s^2 の order まで計算した[3]。(39)，(40)の結果は α^1 の order まではLarsen の結果と（従つて摂動計算とも）一致する。

(40)はLandau level の間隔は等間隔（$\frac{\omega_c^*}{\omega}$）から磁場とnに依存してずれることを示すが、その原因を二つに分けることができる。まず(40)のの第二行目の項であるが、これはpolaron band について有効質量近似を行つた時、band が non-parabolic であるために生じたものである。これに対して第一行の b' による項は、band の底の曲率——つまりeffective mass 自身が磁場の二乗に比例した変化分をもつことを表している。

energy に対して、s^3 の寄与を与えるこの項は、Larsen の計算には含まれていない。彼は、(40)の $2c\left(\frac{\omega_c}{\omega}\right)^2$ の項をmass shift と解釈しているが、それは ϵ の函数形の変化とは関係したものではない。

band の底の曲率の変化を有効質量の変化として表すと次の様になる。

$$\Delta\left(\frac{m_\perp^*}{m}\right) = -b^{-2}b' s^2 = -0.017\,\alpha\sqrt{b}\left(\frac{\omega_c}{\omega}\right)^2$$
$$\Delta\left(\frac{m_{/\!/}^*}{m}\right) = -b^{-2}(b'+e)s^2 = -0.029\,\alpha\sqrt{b}\left(\frac{\omega_c}{\omega}\right)^2 \tag{41}$$

このように、磁場をかけると、垂直，平行方向共にわずかではあるが有効質量

は軽くなる。また異方性も生ずる。mass shift の計算は Tulub によつても行われているが、その結果は、(41)とは異つて、α の小さいところでは $\Delta m_{/\!/}^{*} > 0$ であり、絶対値も一桁程度大きい。彼は基底状態等の energy の計算は行つていない。[4)]

磁場に平行方向の mass shift は磁気抵抗効果の縦効果に寄与する。polaron の場合，はだかの band が球対称であつても縦効果が表れうることは電子構造の決定に関して興味がある。しかし、この効果は量的には非常に小さい。例えば、$m = m_e$，$\alpha = 3$，$\omega = 10^{13}\ \mathrm{sec}^{-1}$ のとき、1％の効果を得るには約 200 KΩ_e の磁場を必要とする。このような磁場では、polaron の分布に関する強磁場の効果が支配的となり、従つて mass shift の効果を検証するのは困難であろう。

指導，討論していただいた金沢秀夫先生に感謝します。この研究は今夏北軽井沢の基研夏期研究施設で、大いに進行しました。付記して、謝意を表します。

References

1) Polaron に関する理論，実験の現状については "Polarons and Excitons" edited by C.G. Kuper and G.D. Whitfield. Oliver and Boyd. 1964
2) G. Whitfield : reference (1) p.183.
3) D.M. Larsen : Phys. Rev. 135 A(1964) A419.
4) A.V. Tulub : Souiet Physics J.E.T.P. 9(1959) 392.